

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИДЕАЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Е. В. Лисица

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование – эффективный способ получения сведений о поведении сложных систем. Сопоставляя результаты вычислений с опытными данными, можно выявить наиболее важные законы, определяющие свойства реальных жидкостей. Один из самых распространенных методов компьютерного моделирования – метод молекулярной динамики. Основой метода молекулярной динамики является численное решение уравнений Ньютона для взаимодействующих частиц. Этот метод позволяет моделировать динамическое поведение молекулярных систем и наблюдать их свойства. В данной работе рассмотрены результаты моделирования свойств идеальной жидкости методом молекулярной динамики, служащие критерием оценки качества программной реализации модели.

Рассматриваемая модель представляет собой систему взаимодействующих классических частиц. Считается, что для частиц системы выполняются законы Ньютона, закон сохранения импульса, сила взаимодействия любых двух молекул зависит только от расстояния между ними и определяется потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса [1, 2]:

$$V(r) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

Для получения более точной оценки макроскопических параметров системы используются периодические краевые условия. Задав начальные скорости частиц (распределение Максвелла) и их координаты, на каждом шаге моделирования используют уравнения равноускоренного движения:

$$x_{i,n+1} = x_{i,n} + v_{i,n}\Delta t + \frac{1}{2}a_{i,n}(\Delta t)^2,$$

$$F_{i,n+1} = -grad(U_{i,n}),$$

$$a_{i,n+1} = \frac{F_{i,n+1}}{m_i},$$

$$v_{i,n+1} = v_{i,n} + \frac{1}{2}(a_{i,n} + a_{i,n+1}).$$

Приведенные выражения представляют алгоритм Верле в скоростной форме.

1. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Температурная зависимость внутренней энергии

Одной из характерных особенностей метода молекулярной динамики является то, что полная энергия определяется начальными условиями, а температура есть величина производная, определяемая только после достижения системой теплового равновесия. Значение шага по времени, необходимое для сохранения полной энергии с точностью до 5% на протяжении 200 шагов по времени, определено как $\Delta t = 1 \cdot 10^{-13} \text{ с}$. Ниже на рис. 1 приведена зависимость полной и кинетической энергий от температуры на протяжении всего времени моделирования, после установления равновесия.

При достижении термодинамического равновесия установившиеся температура и полная энергия колеблются вокруг одного значения (303 К, 40000 e^{-23} Дж). Основной вклад в полную внутреннюю энергию идеального газа вносит её кинетическая составляющая, следовательно, полная внутренняя энергия зависит только от одного параметра температуры, и молекулы идеального газа практически не взаимодействуют друг с другом.

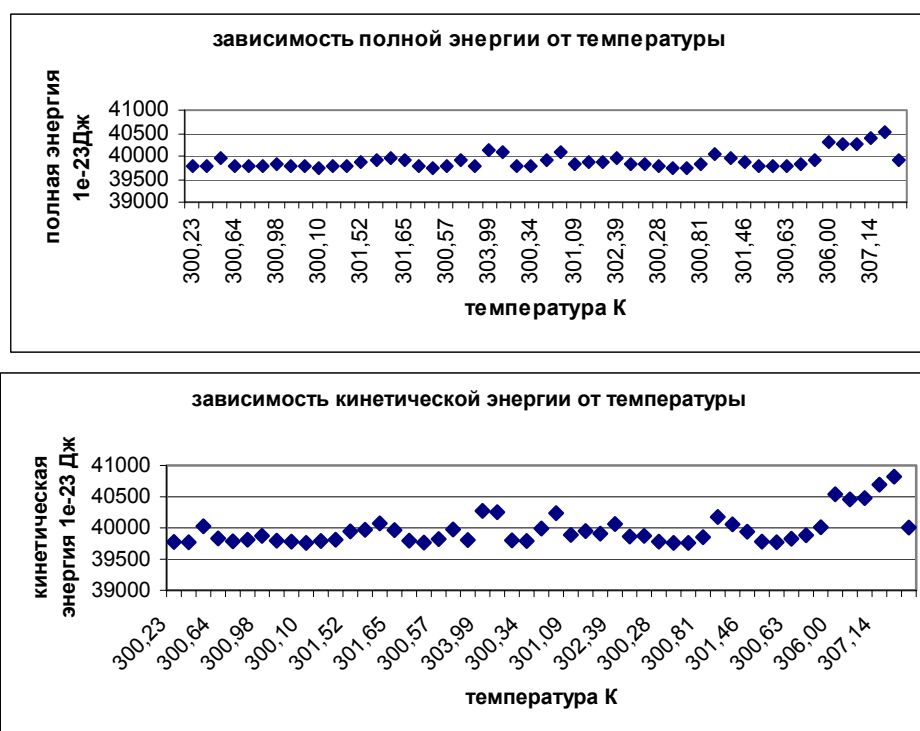


Рис. 1. Зависимость полной и кинетической энергий от температуры

Измерение макроскопических величин

Для определения среднего давления использовались два метода: метод потока и теорема о вириале давления [2]. Для вычисления давления по методу потока (рис. 1) необходимо рассчитать поток импульса через каждую из граней ячейки за один шаг по времени.

Среднее значение давления, рассчитанное по данному методу составило 135кПа. Другой способ вычисления давления (рис. 2) следует из теоремы вириала:

$$PV = NkT + \frac{1}{d} \left\langle \sum_i^N r_i \cdot F_i \right\rangle,$$

Среднее значение давления в этом случае равно 91.5 кПа.

2. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Для описания поведения реальных газов в широком интервале температур используется уравнение Ван-дер-Ваальса:

$$P = kT \frac{\rho}{1 - b\rho} - a\rho^2$$

Построив зависимость давления для различных значений температуры (рис. 4), можно найти значения феноменологических параметров:

$$a = 0.15 \frac{\text{Па} \cdot \text{м}^6}{\text{моль}^2}, \quad b = 34 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^3}{\text{моль}}.$$

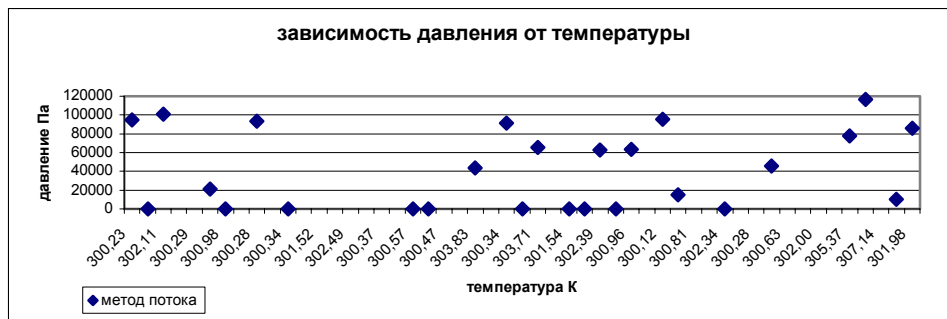


Рис. 2. Зависимость давления от температуры (метод потока)



Рис. 3. Зависимость давления от температуры (метод вириала)

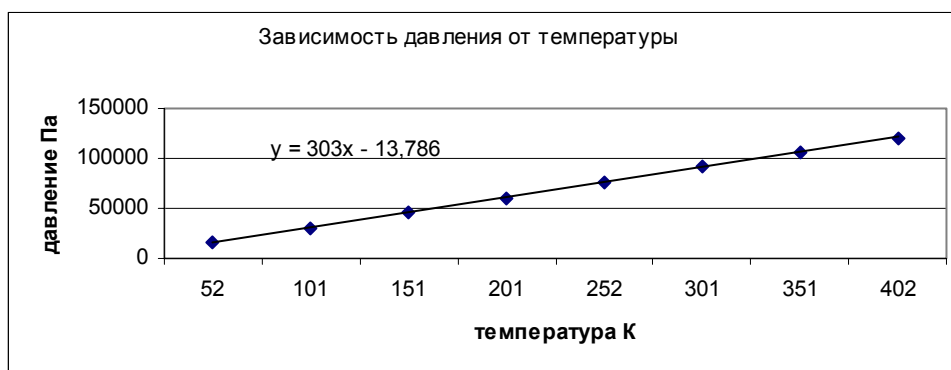


Рис. 4. Зависимость давления от температуры

3. ПРОВЕРКА ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

При моделировании системы выполнялся закон сохранения полной энергии, за счёт выбора шага по времени и свойство, отражающее закон сохранения импульса (центр масс изолированной системы остаётся на месте). Сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными производилось также с использованием функции распределения расстояний между молекулами (рис. 5).



Рис. 5. Функция распределения расстояний между молекулами

ВЫВОДЫ

В данной работе метод молекулярной динамики использован для изучения идеальной жидкости. Моделирование системы всего лишь из 64 частиц уже позволяет выявить некоторые качественные свойства и измерить наиболее важные макроскопические параметры системы. Для более точного получения количественных результатов требуется моделирование систем с большим числом частиц. Получены основные макроскопические параметры для простого идеального газа на примере аргона, такие как удельная теплоёмкость, постоянные Ван-дер-Ваальса. Сравнение результатов компьютерного моделирования с измеренными величинами

указывает на корректность программной реализации использованного алгоритма.

Литература

1. *Rapaport D. C.* The art of molecular dynamics simulation. Cambridge, 2004.
2. *Гулд Х., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990.

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММ ДЛЯ GRID

А. Г. Лукошко

В настоящее время огромную популярность приобретают GRID-сети. GRID – это географически распределенная инфраструктура, объединяющая множество ресурсов разных типов (процессоры, долговременная и оперативная память, хранилища и базы данных, сети), доступ к которым пользователь может получить из любой точки, независимо от места их расположения. GRID предполагает коллективный разделяемый режим доступа к ресурсам и к связанным с ними услугам в рамках глобально распределенных виртуальных организаций, состоящих из предприятий и отдельных специалистов, совместно использующих общие ресурсы. В каждой виртуальной организации имеется своя собственная политика поведения ее участников, которые должны соблюдать установленные правила. Виртуальная организация может образовываться динамически и иметь ограниченное время существования [1].

Существенная разница в организации сети потребовала пересмотра подхода к программированию. Большое количество новых сервисов и библиотек функций со своими специфическими API требуют длительного освоения.

В данном случае для разработки распределенных приложений было бы предпочтительнее использовать опыт программистов, которые уже разрабатывали параллельные программы. В настоящее время основным стандартом программирования параллельных программ является MPI (Message Passing Interface).

И возможность разрабатывать приложения для GRID по стандарту MPI существует. Специальная реализация MPICH-G2, работающая в среде Globus Toolkit, позволяет компилировать и запускать MPI-приложения без модификации кода.

MPICH-G2 – это реализация Message Passing Interface (MPI) с поддержкой GRID, которая использует сервисы Globus Toolkit (например, запуск задания, обеспечение безопасности) и позволяет программисту соединить много компьютеров, в общем случае, различной архитектуры для выполнения приложений MPI. MPICH-G2 автоматически преобразо-